

МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА

Этап 3. **Защита**
проекта. Коллективное обсуждение
результата проекта, самооценка
деятельности.

Работу выполнили студентки НПИбд-02-18

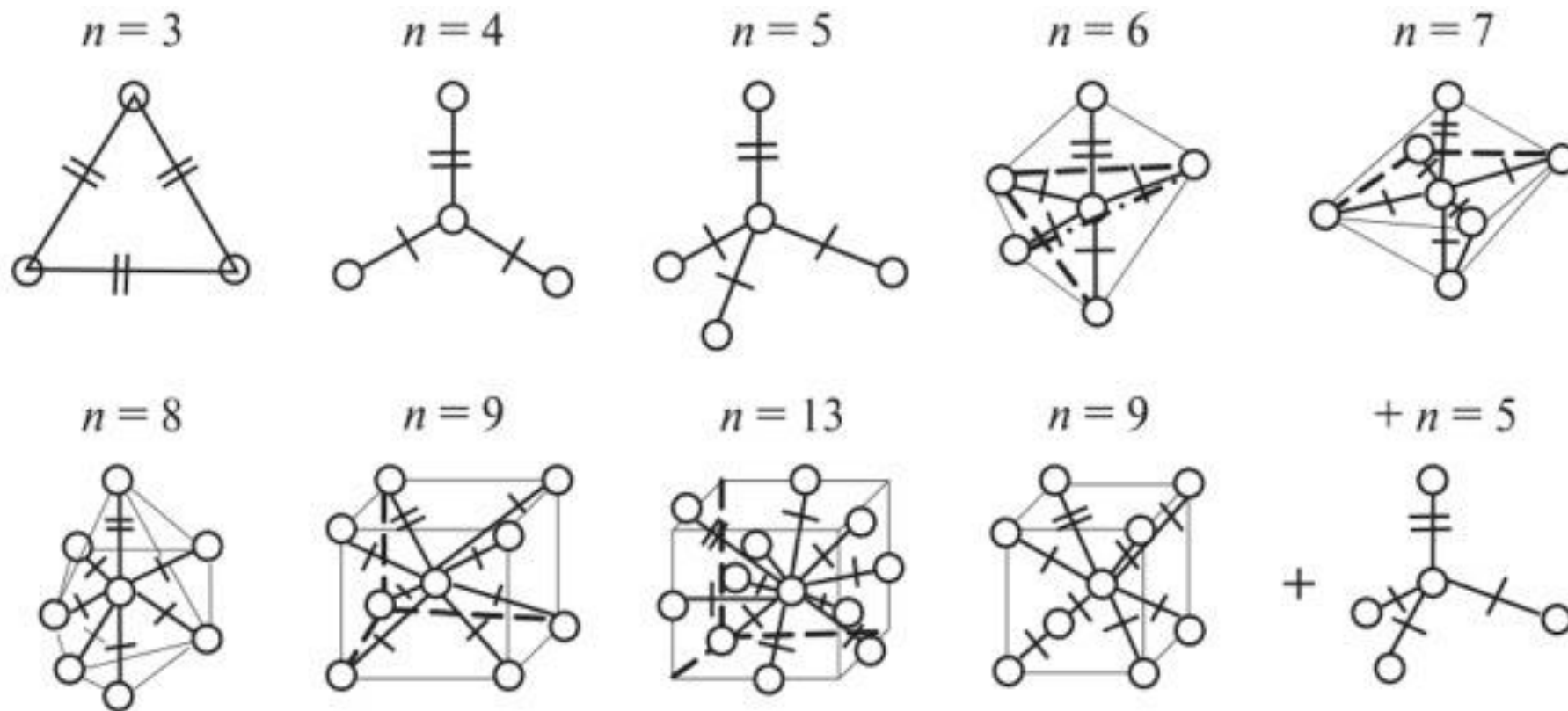
Бурба А. В., Крючкова В. М., Никитаева А. С.,

Фогилева К. М., Шапошникова А. С.

Проблема



Что такое кластер?



Задачи

1. Взять кластеры с «магическим» числом атомов 7 и 19.
2. Исследовать в двумерной модели плавление этих малых кластеров.
3. Проследить за изменениями энергии атомов кластеров при изменении температуры, используя для этого соответствующие формулы.
4. Составить график изменений зависимости средней температуры от полной энергии одного атома.

Подготовка

$$\sum E_k = \frac{T(2N - 3)k}{2}$$



$$E_k = \frac{T(2N - 3)k}{2}$$

Программа

```
import math

import matplotlib.pyplot as plt

to = 1000

tmax = 2348

dt = 10

t = np.arange(to, tmax, dt)

N1 = 7

N2 = 19
```

```
def Ek(N, t):

    ek = (t*(2*N-3) *1.380649*pow (10, -
23))/2

    return ek

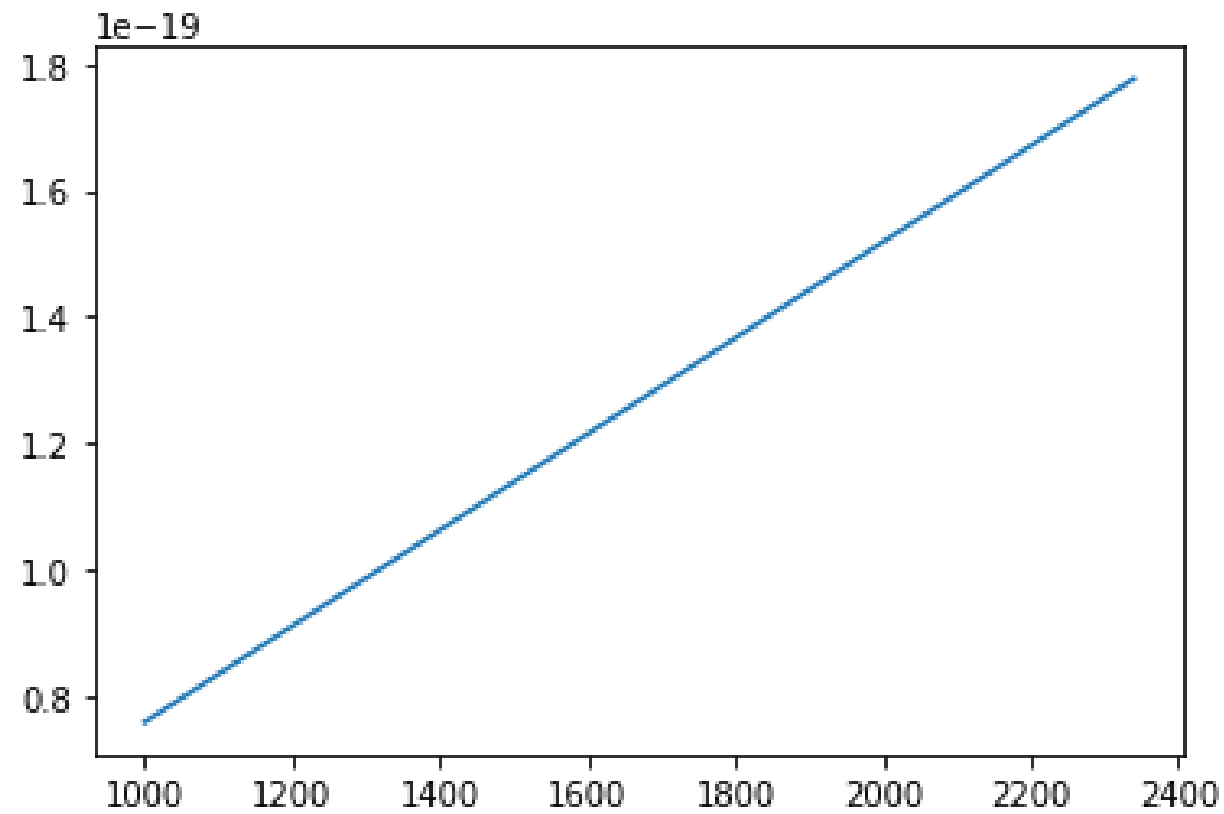
e1 = Ek(N1, t)

e2 = Ek(N2, t)

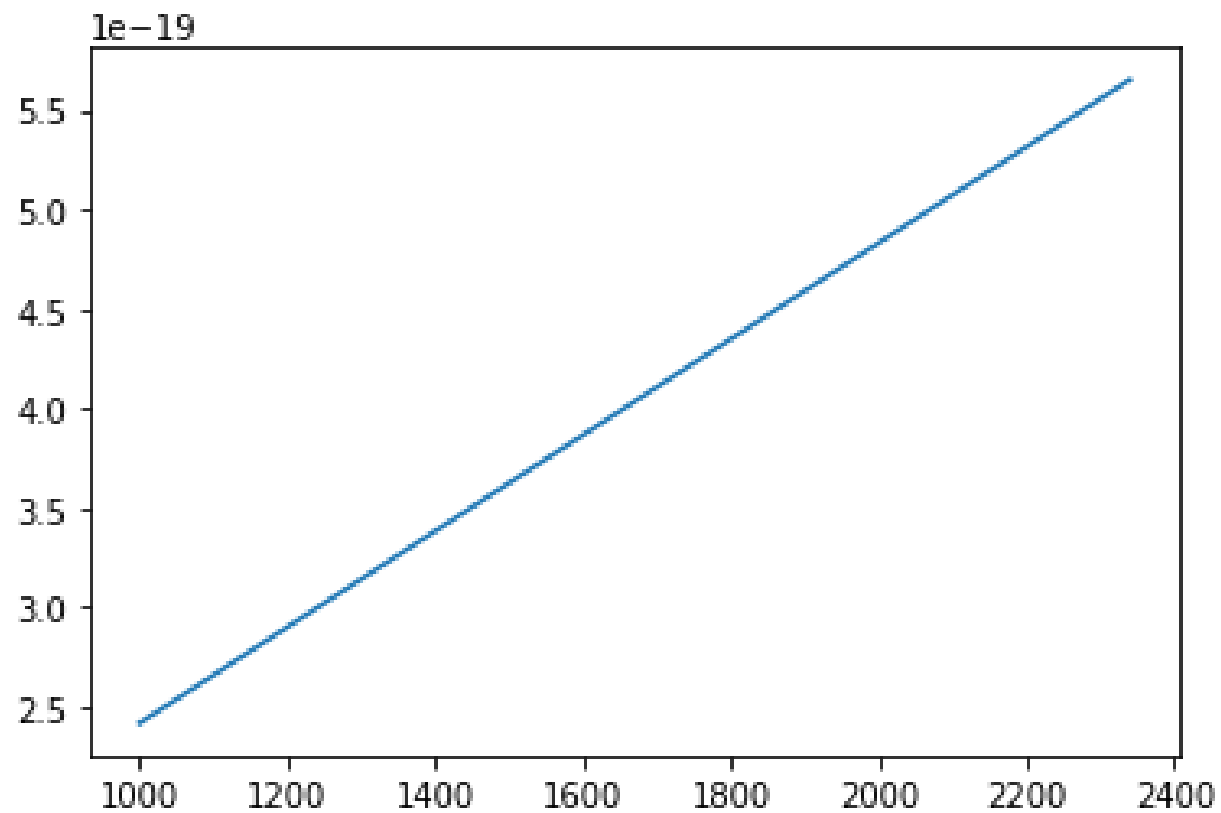
plt.plot(t, e1)

plt.plot(t, e2)
```

Кластер с N=7



Кластер с N=19



Выводы



**СПАСИБО ЗА
ВНИМАНИЕ!**